



小特集 IAEA における原子分子データ Coordinated Research Projects (CRP)

4. データセンターネットワーク活動

4. Data Centre Network Activities

村上 泉¹⁾, 仲野 友英²⁾

MURAKAMI Izumi¹⁾ and NAKANO Tomohide²⁾

¹⁾核融合科学研究所, ²⁾日本原子力研究開発機構那珂核融合研究所核融合研究開発部門

(原稿受付: 2013年8月23日)

IAEA の原子分子データユニットは1977年よりデータセンターネットワークを主宰し, 核融合プラズマ研究のための原子分子過程およびプラズマ・壁相互作用の文献および数値データベースの作成と提供を国際的な協力関係のもとで進めるため, データ生成やデータベース活動の状況とその方向性, データニーズなどを隔年開催の会議で議論している. 日本からは核融合科学研究所と日本原子力研究開発機構が参加している.

Keywords:

Data needs, data compilation, data evaluation, counsel for the unit

4.1 IAEA データセンターネットワーク

本小特集の1章で紹介されたように, IAEA は原子力の平和利用のために1957年に設立され, 当初より核融合研究に深くかかわっている. 国際核融合研究評議会 (IFRC) を設置・開催し, 国際的な核融合研究情報の交換・共有を進めるための国際会議を1961年より隔年開催している. 1974年に東京で開催された IFRC において, 核融合プラズマ工学発展のために, 原子分子データの必要性和国際的な協力体制でのデータサービスの必要性がIAEAへ提言された. この提言は, 名古屋大学旧プラズマ研究所において1973年より高柳らによって組織されたスタディーグループでの水素, ヘリウムおよびその同位体の原子・イオンと光子・電子との衝突過程断面積の収集, 評価活動[1-3]に端を発して行われた. その後1976年にIAEAの諮問委員会によってデータセンターネットワークの設置が提案され, 1977年に原子分子データユニットの設置, データセンターネットワーク (DCN) の第1回会議が開催された. 日本からは, 旧プラズマ研究所と同時に, 旧日本原子力研究所那珂研究所が第1回目より参加し, 中核メンバーとして今日に至っている.

IAEA DCN 会議では, 核融合プラズマ研究に必要な原子分子 (AM) 過程およびプラズマ・壁相互作用 (PWI) の数値データ, 文献データの収集活動, データベース, 関連する研究活動などが報告, 議論され, データ交換フォーマットの必要性や, 整備すべきデータのリスト作成など, 国際的なデータ活動の方向性などが議論されている. 参加しているデータセンターごとに主要な活動がおおよそ異なり, 相補的になっている. 近年, 会議は2年ごとに開催されており, その報告がIAEAのINDC-NDSレポートとして出版され, 原子分子データユニットのホームページ[4]から閲覧できる. 今年2013年の9月に第22回目の会議が開かれる

予定になっている. 近年の参加センターは, 日本から核融合科学研究所 (核融合研) と日本原子力研究開発機構 (原子力機構) のほか, アメリカの国立標準技術研究所 (NIST) とオークリッジ国立研究所 (ORNL), ロシアのクルチャトフ研究所, ドイツのマックスプランク研究所とユーリッヒ研究センター (FZJ; 2011年より), 中国のCRAAMD (北京応用物理与計算数学研究所), 韓国の原子力研究所 (KAERI) と国立核融合研究所 (NFRI; 2011年より), イギリスのADAS (JET およびストラスカイデ大学; 2009年より), イタリアのENEA (2009年まで), フランスのパリ第11大学プラズマ物理研究所 (LPGP; 2009年まで) などである. それぞれの国や研究所の事情等により, データセンターの活動の低下や閉鎖, データセンターを担ってきた研究者の高齢化などでの不参加や新たな参加などで, 参加メンバーは少しずつ入れ替わっている.

DCN 会議での議論から発展して, データ交換フォーマット XSAMS (XML スキーマ) の策定, コードセンターネットワーク (CCN) の設置, データ評価に関する技術会議の開催など, 様々な動きにつながっている.

4.2 核融合科学研究所における原子分子データ活動とデータセンターネットワーク

核融合科学研究所 (核融合研) における原子分子データベース活動は, 上述したように, 名古屋大学旧プラズマ研究所時代の1970年代に行われたデータ収集活動から始まっている. 高柳らが収集・評価した水素, ヘリウムおよびその同位体の原子・イオンと光子・電子との衝突過程断面積データは, IPPJ-DT レポートとして出版されている[1-3].

旧プラズマ研究所時代より, 核融合研では AM 衝突過程に着目し, 電子衝突電離・励起過程の文献データおよび数値データ, 重粒子衝突過程の文献データおよび数値デー

タ, PWI 関係としてスパッタリング収率と後方散乱係数データの収集と, データベース作成を行ってきた。収集されたデータは, IPPJ-AM レポートシリーズおよび NIFS-DATA レポートシリーズで出版されており, それらの PDF ファイルは現在核融合研のデータベースのウェブページ[5]から取得可能である。

AM 衝突過程に関する文献データについては, 定期的・網羅的に収集し, データ集としてまとめたレポートとして出版されている。電子衝突に関しては高柳ら[6], 市川[7]が, 重粒子衝突に関しては俵[8-10]がレポートを出版しており, IAEA AM データユニットが作成している文献データベースへも提供され, IAEA のデータベース集 CIAMDA でも出版されている。しかしながら, インターネット環境の普及に伴い, 文献データ収集活動は引き継がれず, 核融合研では2000年以降は積極的には行っていない。国際的にみても同様の傾向があり, 特にIAEAのAM/PWI文献データベースを支えていたアメリカのオークリッジ国立研究所での文献データベース作成は, 同研究所の核融合原子データセンターの閉鎖に伴い2009年出版のデータ以降, データのアップデートは行われていない。

数値データについては, 国内の共同研究者の協力のもと, データ収集・データベース構築に加え, データ評価を行ってきた。

収集した AM / PWI 数値データをもとに, 1980年代に汎用計算機上にデータベースが構築され[11-13], 共同研究者らに提供された。その後, これらのデータベースを1997年に UNIX サーバに移行し, ウェブ上からアクセスできるようになった[5, 14, 15]。これらの数値データベースは, 検索機能やグラフ表示機能を有し, データの比較が容易にできるうえ, データの出典情報が整備されてトレース可能なため, データ評価にも活用された。

IAEA の AM データユニットは, DCN のメンバーとなっているデータセンター等が作成・公開しているウェブ上のデータベースに対して, 一度にデータが検索できる検索エンジン GENIE を用意し, 2001年よりウェブ上で公開している[16]。これは, もともとは2000年に行われた第2回原子分子データとその応用に関する国際会議 (ICAM-DATA) での議論が元になっている。GENIE では, 原子の波長と, 電子衝突励起・電離断面積の検索が, イオン種を指定するだけで複数のデータベースにわたって検索できるようになっており, 核融合研の原子分子数値データベースの AMDIS も, GENIE を通して検索できるようになっている。GENIE の出力は各データベースの出力をそのまま表示している。

AM 衝突過程のデータは, 実験データを中心に評価を行い, 電子衝突励起過程などは理論データを用いて評価した。評価したデータは, 半経験則や解析式などでフィッティングし, 利用しやすい形でまとめられている。これまで評価された原子分子の衝突データ (電子衝突励起・電子衝突電離の断面積や速度係数, 荷電交換断面積等) は, 炭素および酸素イオン[17], 中性ヘリウム[18], ヘリウム様イオン[19], 炭素原子と炭素イオン[20], 窒素原子と窒素

様イオン[21], 炭化水素[22, 23], リチウムイオン[24], 鉄イオン[25, 26]のほか, 電子衝突電離断面積の実験値を使った経験則の評価と補正項の提案[27]も行われた。これらは, 核融合プラズマの不純物分光計測や周辺プラズマでの衝突過程などに関連したデータを中心にデータ評価を行ってきたが, 核融合プラズマ研究に必要なすべてのデータまでは評価できていない。

一方, PWI 関係のデータに関しては, モンテカルロ計算によって得られたデータからスパッタリング収率や後方散乱係数に対する経験式が導かれ, IPPJ-AM レポートや NIFS-DATA レポートとして出版されている。これらの経験式は, ウェブで公開している核融合研の数値データベースのなかの SPUTY と BACKS, CURVE (経験則のみ) にも取り込まれ, 計算値が図に表示できるようになっている[28, 29]。

以上のような核融合研における AM / PWI データおよびデータベース活動や関連する研究活動に関して, DCN 会議において報告を行ってきた。最近の関連する研究活動としては, たとえば, CRP 活動とも連携したタングステンイオンの分光データ計測や衝突輻射モデル構築によるスペクトル計算などの報告を第21回 DCN 会議 (2009年) で行った。DCN 会議で議論されたデータニーズに関しては, 共同研究者で組織しているデータ収集作業会での収集活動方針にも反映させている。

核融合研でのデータ評価活動は, 2012年に韓国で開催されたデータ評価に関する IAEA 技術会議でも報告を行った[30]。AM 衝突過程断面積等のデータ評価は, データにエネルギー依存性があるため, 発光線波長の評価よりも難度が高く, 考慮すべき点も多い。電子衝突電離断面積は実験データがあるが, 電子衝突励起断面積はほとんど理論計算しかないため, 衝突過程によって, 評価方法などが異なってくる。韓国での技術会議では, 衝突過程ごとにチームをつくり, 評価方針の策定やモデルケースとしてのデータ評価を行うことなどが決められた。我々はデータセンターとして, データベースをデータ評価のためのプラットフォームとしても提供できる。IAEA の AM データユニットでは, 評価済みデータの文献リストなどの整備を始めており, 核融合研での活動成果などを提供している。評価データのデータベースに関しては, 今後も DCN で議論が進められていくことになっている。

核融合研は, 今後も, DCN の中核メンバーの一員として, 国内の共同研究者とも協力して核融合研究に必要な原子分子データ活動を進めていきたいと考えている。

(村上 泉)

4.3 日本原子力研究開発機構の IAEA 原子分子データユニットに関わる活動

4.3.1 IAEA データセンターネットワークでの活動

日本原子力研究開発機構 (原子力機構, 旧日本原子力研究所) は, 核融合科学研究所 (核融合研, 旧プラズマ研究所) とともに, 1977年の第1回から2013年の第22回まで IAEA 原子分子データセンターネットワーク会合に参加し

てきた。この貢献によって、日本は、フランス、ロシア、および米国とともにデータセンターネットワークの中核グループと評されている。

原子力機構では、それ以来、核融合研究開発に必要なスペクトルデータ（波長表）や衝突データ（電離・再結合断面積など）の収集、生産、評価などを行ってきた。これらの成果をデータセンターネットワーク会合で報告するとともに、現在ではウェブなどを通じて広く利用者に供している[31]。一方で、原子力機構はJT-60を中心とした核融合研究開発の世界的拠点の一つであり、原子分子データを享受する立場でもあることから、データセンターネットワーク会合では、データ利用者としての観点からデータニーズを示し、今後のデータ収集の優先度付けを提案する役割も担っている。

また、原子力機構では、データセンターネットワーク会合での世界の原子分子データセンターの活動状況の報告を参考に、データ収集、生産、および評価の動向を判断し、それらと重複せず、かつ核融合研究開発に必要なデータに限って収集、生産、および評価などの活動を行っている。現在では、データセンターネットワーク会合への参加センターは核融合研究開発に直接的には関連の低いデータ、たとえば照明やプラズマプロセッシング向けのデータも収集している場合もあるが、データの収集、生産、評価の方法や、とくにオンライン・データベースによるデータ提供や、データセンター間のデータ交換の方法などについては参考になる部分も多く、原子力機構のウェブサイトの改善などに役立っている。

4.3.2 収集、生産および評価の対象となる原子分子データ

核融合研究開発に必要なデータは、大別すると、高温炉心プラズマ中ではタングステンなどの重元素の高電離イオンのスペクトルデータおよび衝突データ、低温周辺プラズマ中では低電離タングステンイオンのスペクトルおよび衝突データ、炭素や窒素などの軽元素不純物および炭化水素や水素分子などの衝突データ、さらにはプラズマ対向壁材料とプラズマの相互作用データ（スパッタリングや水素リテンションなど）である。これらのデータニーズは核融合研究開発に特有であり、データセンターネットワーク会合などの枠組みで生産する必要がある。たとえば、少数の例外を除けば、タングステンの高電離イオンが存在するプラズマ、およびトリチウムを含むプラズマは核融合炉心プラズマのみである（水素分子の振動および回転準位は同位体間で大きく変化するため、 H_2 のデータを D_2 、 T_2 およびDT分子などに転用できない）。いずれの場合も、核融合研究でのニーズが駆動源となって、原子分子物理の専門家を刺激し、同分野の重要な研究対象となっている。

今後は、ITERなどでのデータニーズを見据え、タングステンイオンの電離・再結合速度係数の実験による精度評価、水素同位体分子の衝突データの系統的な整備、窒素など冷却用ガスの低温プラズマ中での電荷移行断面積などが主な対象となるであろう。

4.3.3 近年の成果・実績

原子力機構では、核融合研究開発のニーズ（壁材・構造

材およびプラズマ冷却用のガス）から、Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Kr および Mo の高電離イオンのスペクトルデータ[32]を、米国標準技術研究所(NIST)との協力により整備した。天体や照明など他分野を含み世界標準ともいえるNISTのスペクトルデータベース[33]中にある、Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu および Mo の高電離イオンに限れば、多くのスペクトルデータがこの成果による。

炭素材タイルから発生する炭化水素不純物の研究のため、炭化水素の電子衝突断面積を収集、評価し、系統的に整理して経験式を作成した[34]。このデータ集は低温プラズマ中の炭化水素の解離過程のモデリング[35]に有用である。断面積データが衝突エネルギーに対して離散的にしか存在しない場合、しばしば内挿による問題が生じるが、このデータ集では経験式がサブルーチンとして準備されているため、容易にコードに実装可能である。

また、JT-60の高温の主プラズマを利用した高電離キセノンイオン[36]、高電離タングステンイオン[37]のスペクトルデータの生産、高電離タングステンイオンの電離・再結合速度係数の評価[38]や、低温のダイバータプラズマを利用した炭化水素の発光速度係数の導出[39]などのデータ生産も行った。

このほかに、国内の専門家に委託し、原子分子データの収集、生産および評価をすすめる、核融合研究開発に必要なデータを広く整備した（近年では、タングステンのスペクトルデータおよび電荷変化断面積、窒素・炭素・ベリリウム多価イオンと励起状態水素原子の電荷移行断面積、水素分子の解離性再結合断面積など）。

4.3.4 IAEA IFRC 原子分子小委員会での活動

原子力機構は、データセンターネットワーク会合と交互に隔年で開催されるIAEA国際核融合研究評議会・原子分子データ小委員会にも出席し、IAEA原子分子データユニットの過去2年間の活動内容と今後2年間の活動方針を審議し、審議結果を上記の評議会に上申する役割も担っている。この委員会を中心とする議題はCRP（本特集第2章参照）によるデータ収集の対象である。原子力機構からの代表者は、本小委員会の委員中では例外的に、データ生産者であると同時に、核融合プラズマの研究者、すなわちデータ利用者という立場である。そのため、現状のデータベースの整備状況を把握した上で、データニーズを、そのデータが核融合研究開発でどのように利用されるか、どのような人材がそのデータを生産可能か、とともに提案することが可能であり、特にこのような観点からの役割を果たしている。

(仲野友英)

参考文献

- [1] 高柳和夫他編：IPPJ-DT-48（名古屋大学プラズマ研究所、1975）。
- [2] 高柳和夫他編：IPPJ-DT-50（名古屋大学プラズマ研究所、1976）。
- [3] K. Takayanagi and H. Suzuki eds., "Cross sections for

- Atomic Processes vol.1 Processes Involving Hydrogen Isotopes, Their Ions, Electrons and Photons", Research Information Center, Inst. Plasma Phys., Nagoya Univ., Nagoya (1978).
- [4] <http://www-amdis.iaea.org/>
- [5] NIFS Atomic and Molecular Numerical Databases, <http://dbshino.nifs.ac.jp/>
- [6] K. Takayanagi and T. Iwai, IPPJ-AM-7 (IPPJ, Nagoya Univ., Japan, 1978).
- [7] Y. Itikawa, IPPJ-AM-24 (IPPJ, Nagoya Univ., Japan, 1982); NIFS-DATA-63 (NIFS, Japan, 2001).
- [8] H. Tawara, IPPJ-AM-25 (IPPJ, Nagoya Univ., Japan, 1983).
- [9] H. Tawara *et al.*, IPPJ-AM-45 (IPPJ, Nagoya Univ., Japan, 1986).
- [10] H. Tawara, NIFS-DATA-7 (NIFS, 1990); NIFS-DATA-20 (1993); NIFS-DATA-42 (1997); NIFS-DATA-51 (1999).
- [11] T. Kato *et al.*, Phys. Scr. **23**, 198 (1981).
- [12] T. Kato *et al.*, J. Nucl. Mater. **128 & 129**, 1006 (1984).
- [13] T. Kato *et al.* eds., "RIC Users Instruction Manual", Research Information Center, Inst. Plasma Phys., Nagoya Univ. (1985).
- [14] I. Murakami *et al.*, NIST Special Publication **926** (Proceedings of ICAMDATA, Sep. 29-Oct. 9, 1997, Gaithersburg, USA), p.57 (1997).
- [15] I. Murakami *et al.*, Fusion Sci. Tech, **51**, 2T, 138 (2007).
- [16] IAEA GENIE, <http://www-amdis.iaea.org/GENIE/>
- [17] Y. Itikawa *et al.*, IPPJ-AM-27 (1985); Atomic Data Nucl. Data Tables **33**, 149 (1985).
- [18] T. Fujimoto, IPPJ-AM-8 (1978).
- [19] T. Kato and S. Nakazaki, IPPJ-AM-58 (1988); Atomic Data Nucl. Data Tables **42**, 313 (1989).
- [20] H. Suno and T. Kato, NIFS-DATA-91 (2004); Atomic Data Nucl. Data Tables **92**, 407 (2006).
- [21] T. Kato, NIFS-DATA-18 (1992); Atomic Data Nucl. Data Tables **57**, 181 (1994).
- [22] R. Janev *et al.*, NIFS-DATA-64 (2001).
- [23] R. Janev *et al.*, NIFS-DATA-68 (2001).
- [24] I. Murakami *et al.*, NIFS-DATA-86 (2004); Atomic Data Nucl. Data Tables **94**, 161 (2008).
- [25] I. Skobelev *et al.*, NIFS-DATA-95 (2006); NIFS-DATA-99 (2007); Astron. Astrophys. **511**, A60 (2010).
- [26] I. Skobelev *et al.*, NIFS-DATA-104 (2009).
- [27] Y. Itikawa and T. Kato, IPPJ-AM-17 (1981).
- [28] Y. Yamamura and H. Tawara, NIFS-DATA-23 (1995).
- [29] R. Ito *et al.*, IPPJ-AM-41 (1985).
- [30] I. Murakami *et al.*, Fusion Sci. Tech. **63**, 400 (2013).
- [31] H. Kubo *et al.*, Plasma Fusion Res. SERIES **7**, 352 (2006).
- [32] T. Shirai *et al.*, J. Phys. Chem. Ref. Data, Monograph No. **8**.
- [33] <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>
- [34] T. Shirai *et al.*, Atomic Data Nucl. Data Tables **80**, 147 (2002).
- [35] 仲野友英, 門信一郎: プラズマ・核融合学会誌 **80**, 91 (2004).
- [36] H. Kubo *et al.*, J. Nucl. Mater. **363-365**, 1441 (2007).
- [37] J. Yanagibayashi *et al.*, J. Phy. B. **43**, 144013 (2010).
- [38] T. Nakano and the JT-60 Team, J. Nucl. Mater. **415**, S327 (2011).
- [39] T. Nakano *et al.*, *submitted to Nucl. Fusion*.